



TITLE:

3.有機化合物(C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NOS)のab-initio計算における基底関数の選択について(大阪市立大学大学院工学科応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1989年度))

AUTHOR(S):

岡本, 朗

---

CITATION:

岡本, 朗. 3.有機化合物(C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NOS)のab-initio計算における基底関数の選択について(大阪市立大学大学院工学科応用物理学専攻,修士論文題目・アブストラクト(1989年度)). 物性研究 1990, 55(1): 113-113

ISSUE DATE:

1990-10-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94269>

RIGHT:

可能にした。この温度は、レニウム<sup>93</sup>の融点が3453 Kであることを勘案すれば、ほぼ物性による限界点であろうと考えられる。

生成イオン種の同定は飛行時間法による質量分析器を制作し、これを用いて<sup>6</sup>Li<sup>+</sup>と<sup>7</sup>Li<sup>+</sup>の同位体の識別を行なった。

更に、LiCl及び金属Liをイオン源物質としてイオン生成の性能試験を行なっている。LiClでは、イオン源温度2900 Kに於いてLi<sup>+</sup>イオン260  $\mu$ A、金属Liでは同じ条件で310  $\mu$ Aを得、従来の物の約10倍の値を実現している。

### 3. 有機化合物(C<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NOS)のab-initio 計算における基底関数の選択について

岡 本 朗

1970年代J. A. Pople等が、プログラムGaussian 70を公表してから、分子に関するab-initio計算は急速な発展を遂げその変分計算の基礎となる基底関数についてその最良のものを得るための努力が積み重ねられた。しかしながら複雑な基底関数を用いた計算では計算機のファイル容量によって適用される分子の大きさにかなり制限が加わることは避けがたい。そこで本論文においては特にC<sub>7</sub>H<sub>5</sub>NOS分子を例題として分子内の基底関数の精度を安定なベンゼン環と、それ以外に分ける事によってab-initio計算をできるだけ大きな分子に適用することを試みた。

実際には、D軌道を入れることによりN-S間Populationが約360倍になり、さらにベンゼン環に3-21G基底関数を、残りに6-31G基底関数+酸素に結合した炭素、窒素そして硫黄にD軌道を入れると約490倍にもなっている。なおかつベンゼンに6-31G基底関数を用いて計算したときに比ベータールエネルギーは約0.15(%)しか下がっておらず、近似が十分に満足のいく結果が出ている。加えてファイル容量は約95(%)に減少しておりCPUタイムも約85(%)に減少しているので、分割方法及びD軌道の導入は有効であるといえる。